

Simulación Ab Initio de los Isótopos de Hidrógeno en Altas Presiones

Carlo Guerrero

IFN-UPM

En colaboración con:

S. Cuesta y M. Perlado

PROGRAMA



CAMPUS
DE EXCELENCIA
INTERNACIONAL

Instituto de Fusión Nuclear

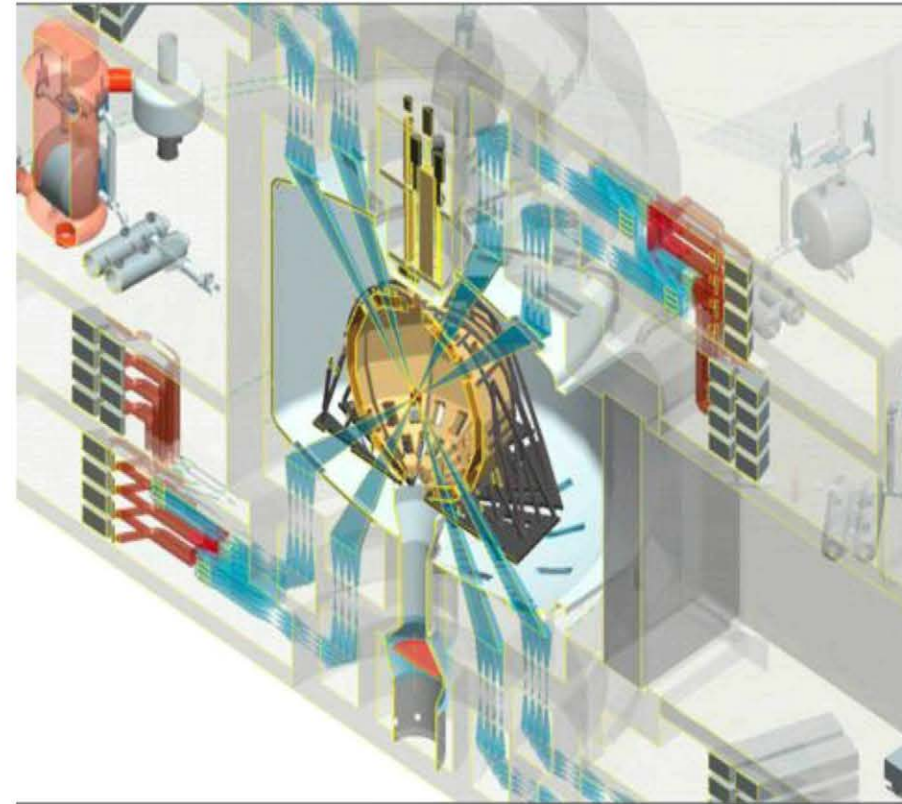
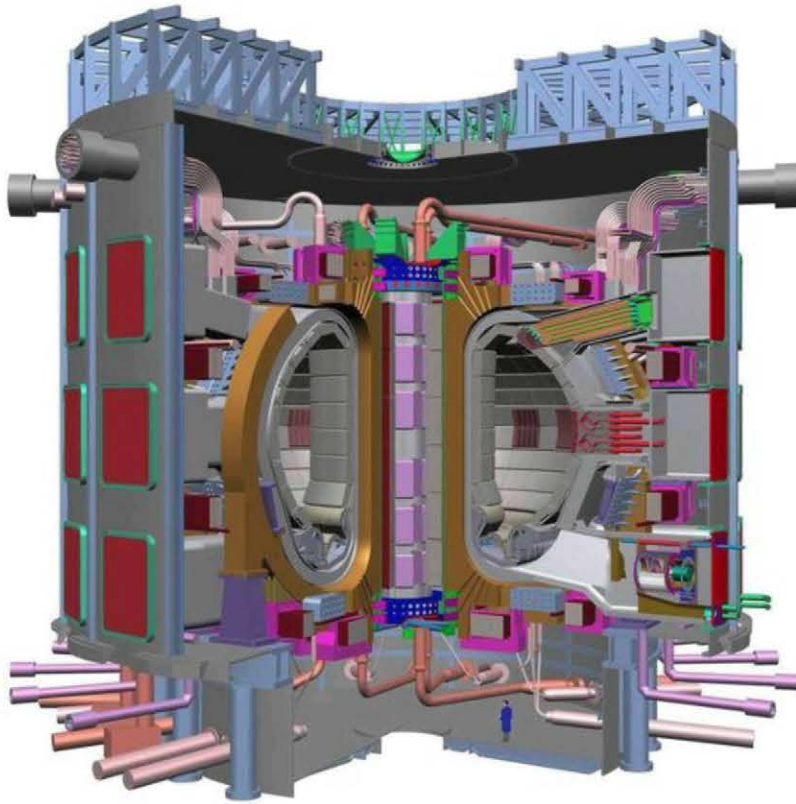
UNIÓN EUROPEA
Fondo Social Europeo
Fondo Social Europeo Invierte en tu futuro





Propuestas: ITER - HiPER

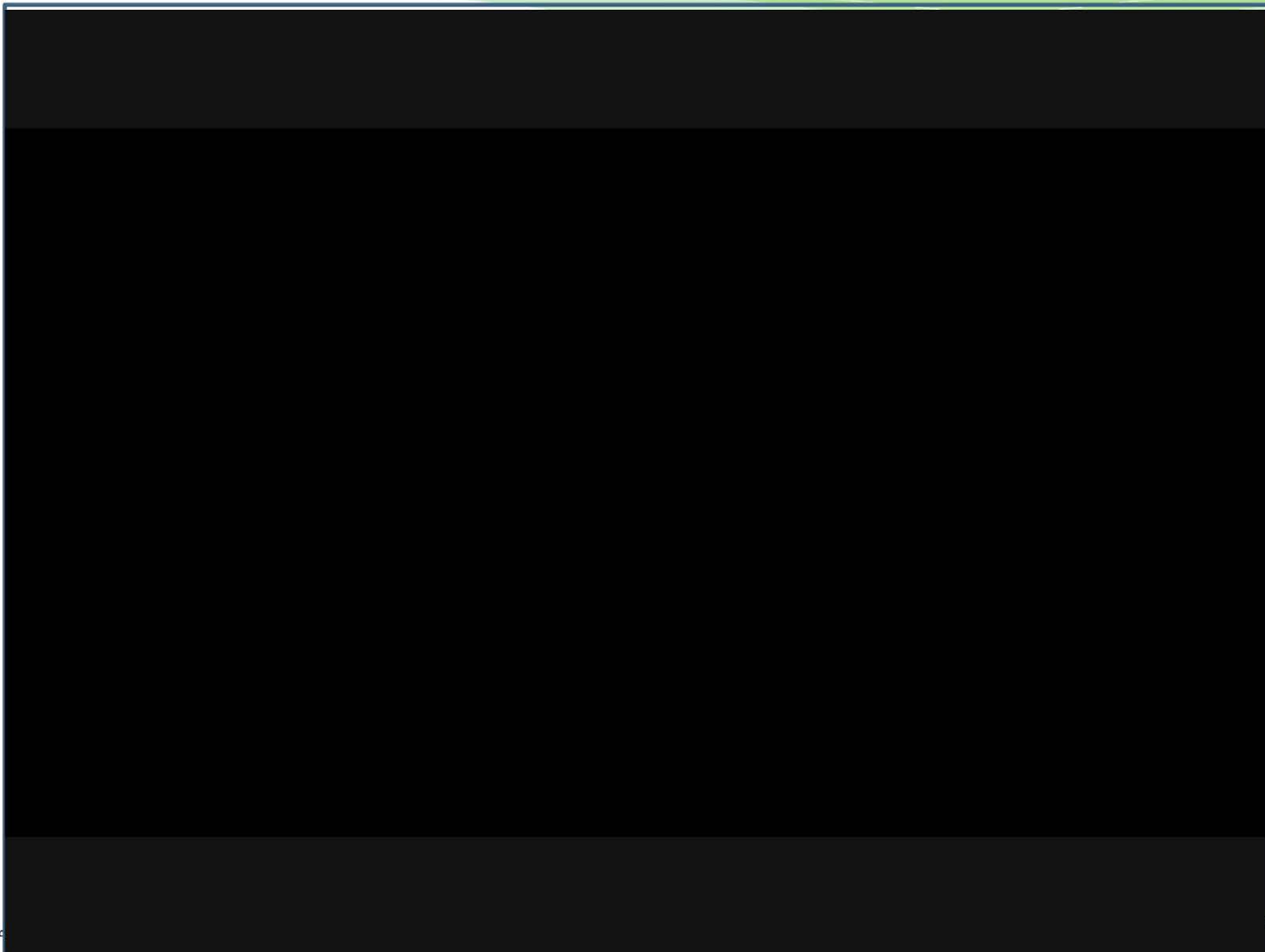
Materiales en Condiciones Extremas



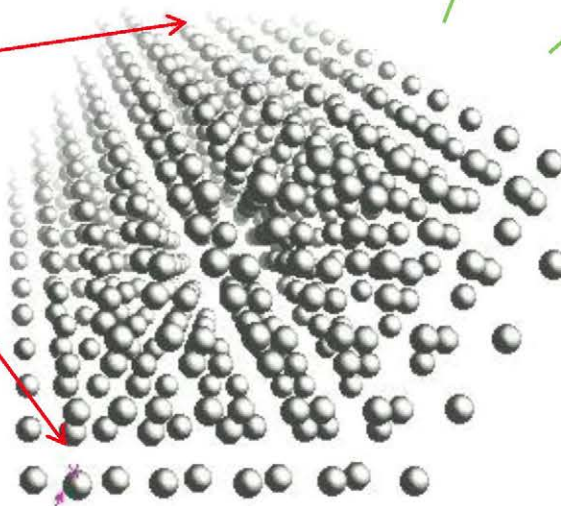
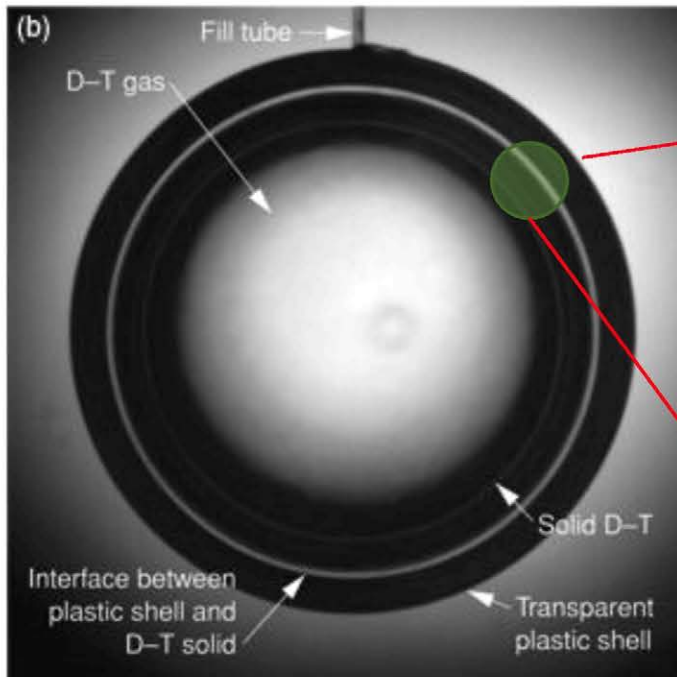
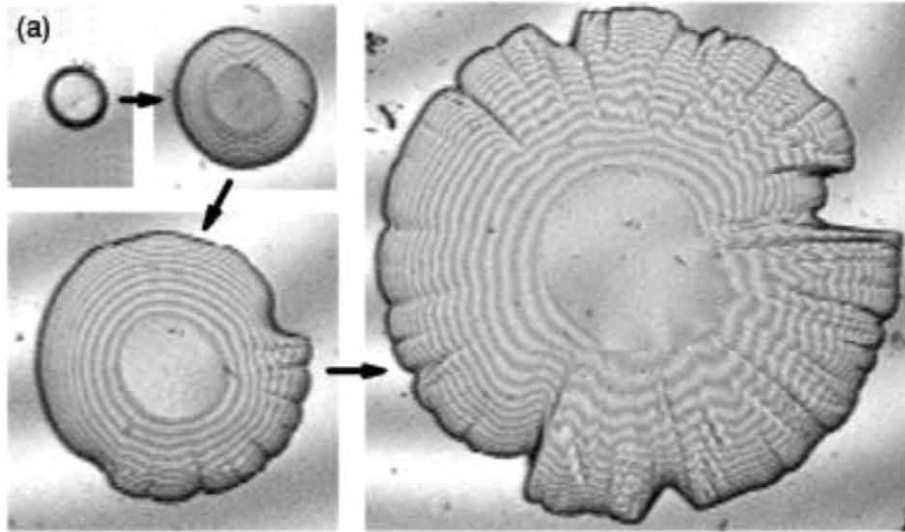


Target ICF

acknowledgment: <http://www.hiper-laser.org/>



Primer Elemento en Estudio: Hidrógeno



Ab Initio

Getting Results

DM Langevin, QMD

New Methods
Thermostat

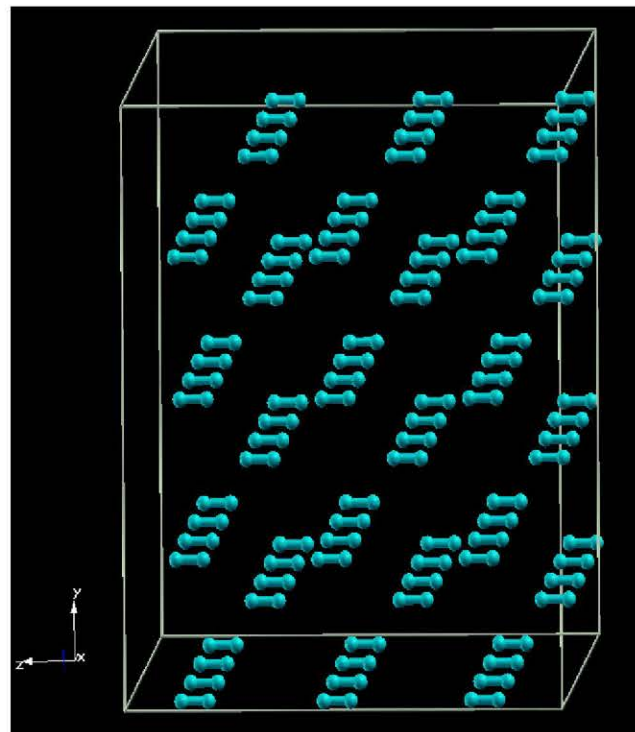
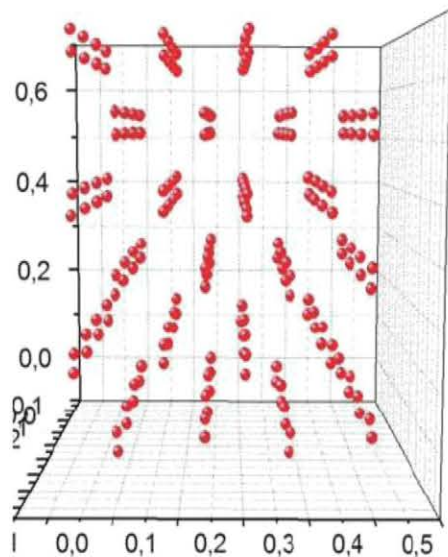
Simple Models

Estructura Cristalina

XCrysDen program



(b)
Crystal
HCP

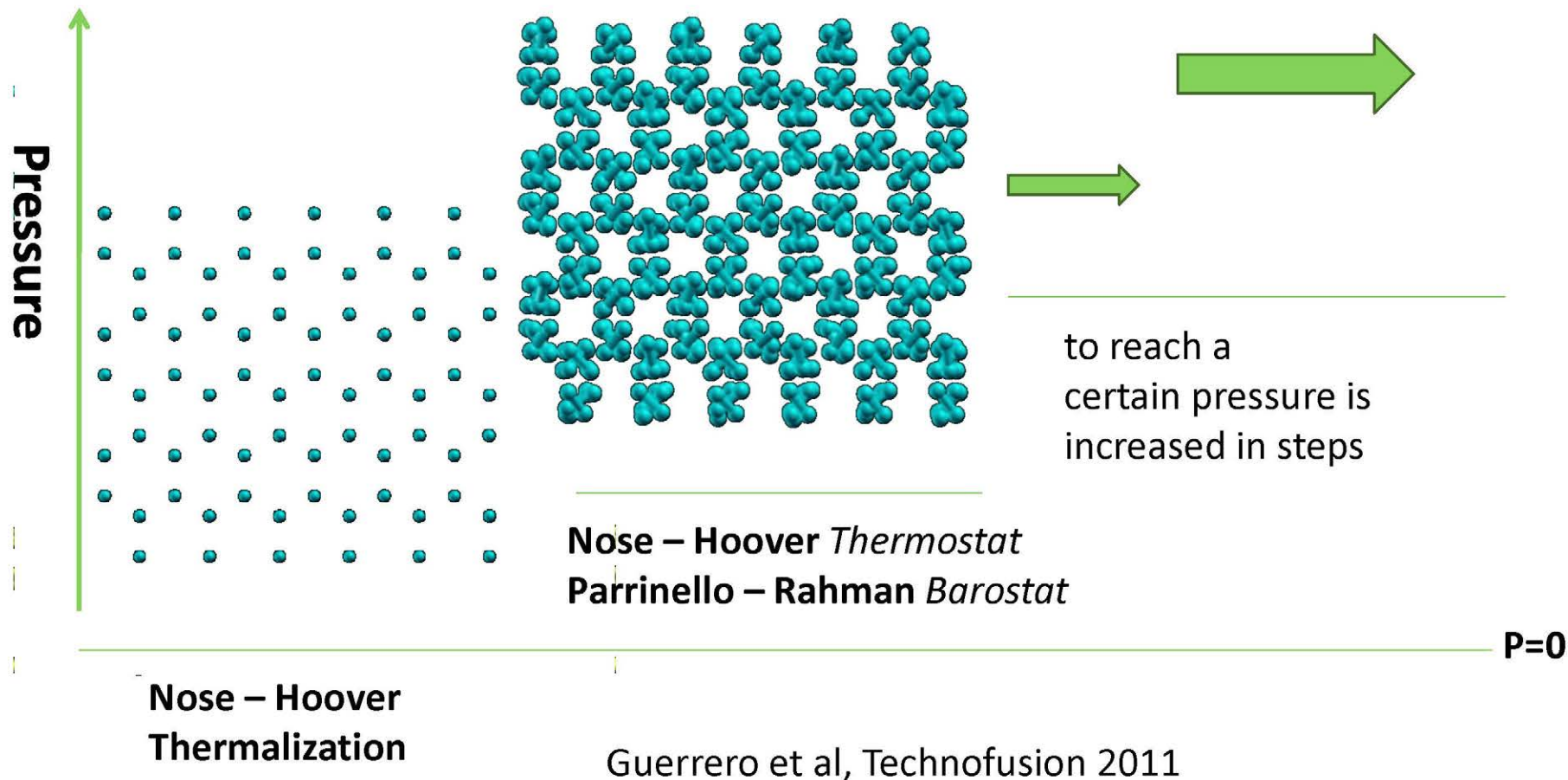


(a) Various combinations that a hydrogen molecule is able to form with its isotopes, hydrogen (H), deuterium (D) and Tritium (T). (b) The distribution of molecules, each pair can be a different mix, is therefore an important factor to consider, in addition to the isotope mixture in the sample.

Guerrero et al, Technofusion 2011

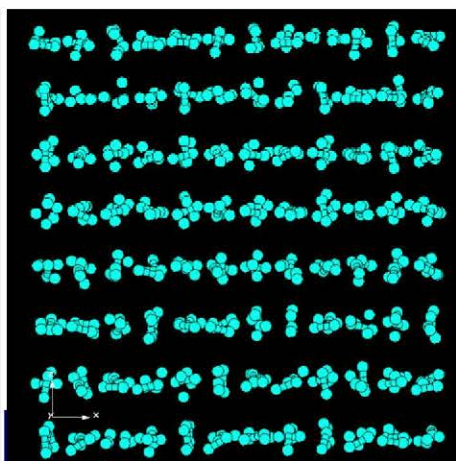
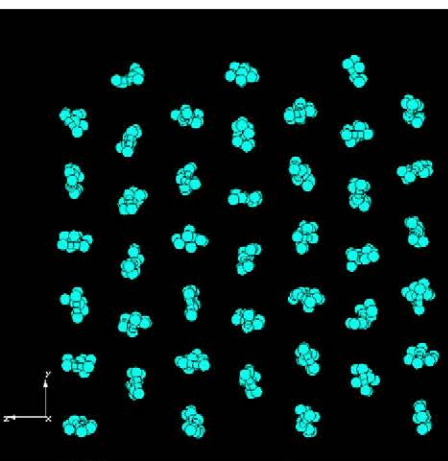
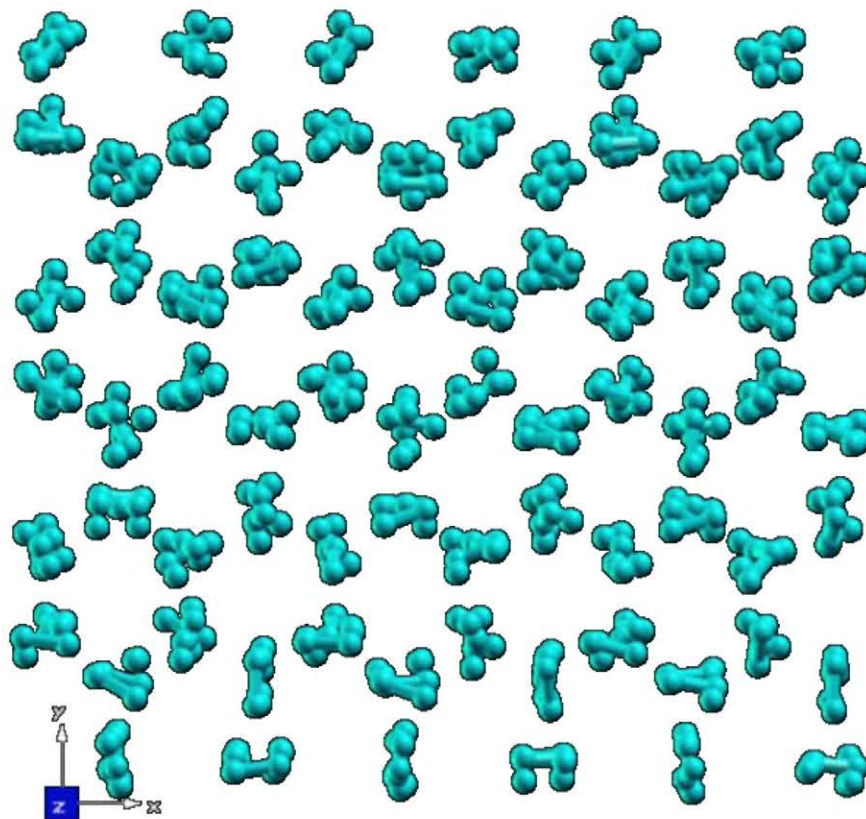
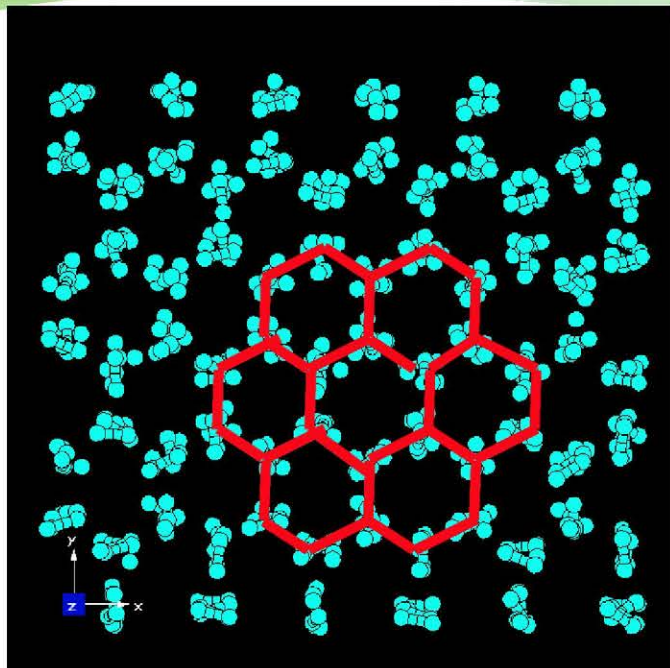


Rampas





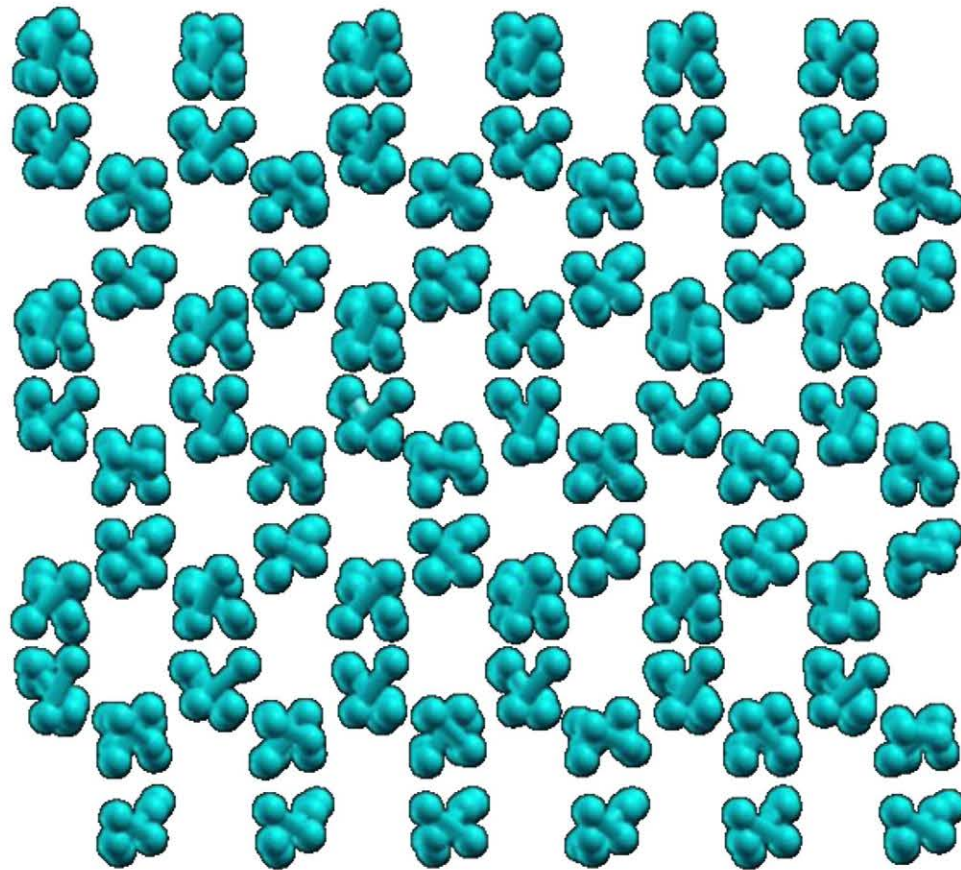
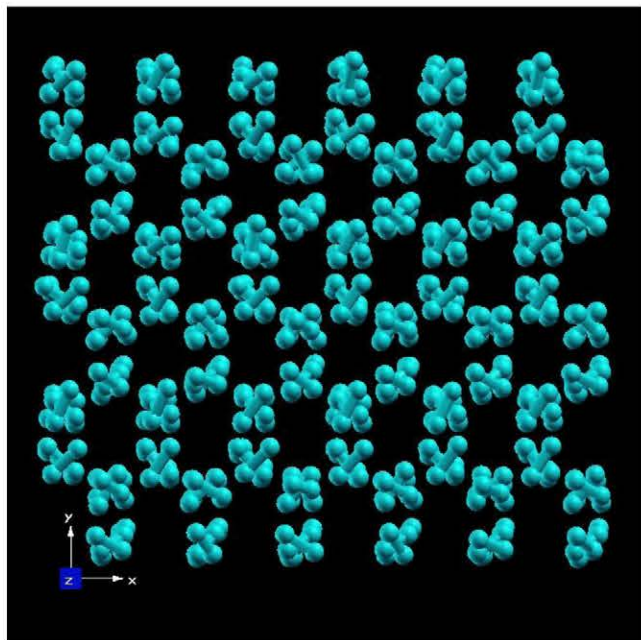
Hidrógeno 15K 1GPa 1ps



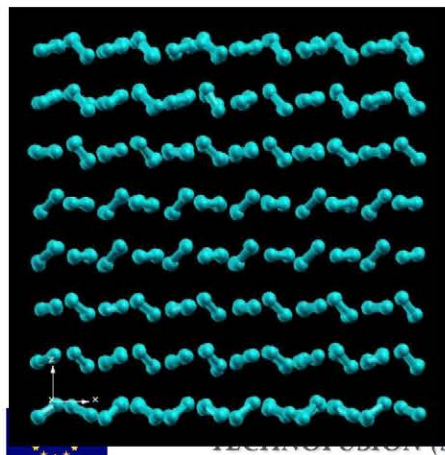
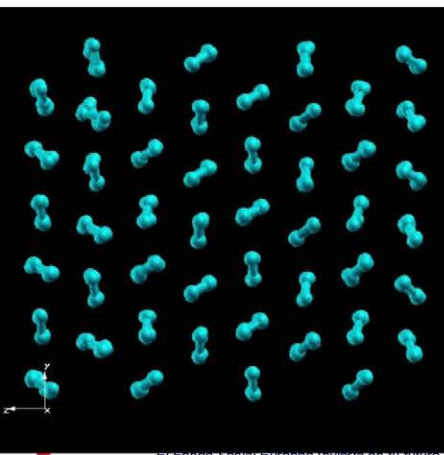
Guerrero et al, Proceeding IFSA 2012



Hidrógeno 15K 45 GPa 1 ps

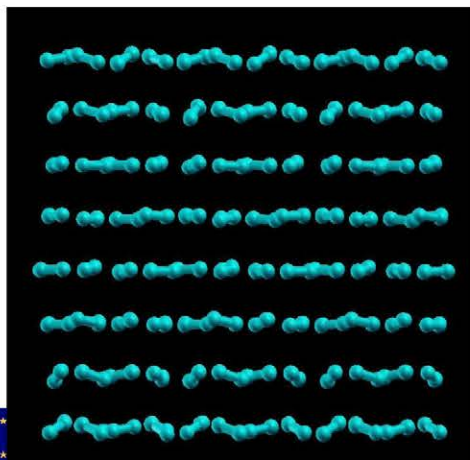
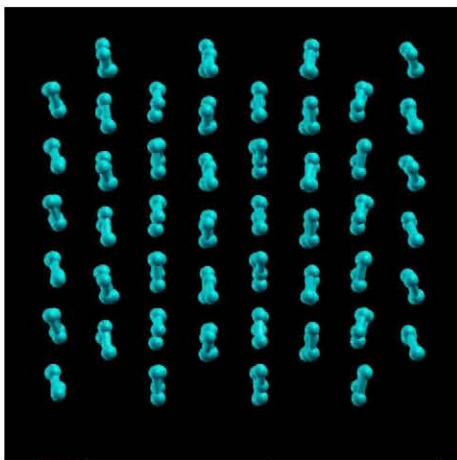
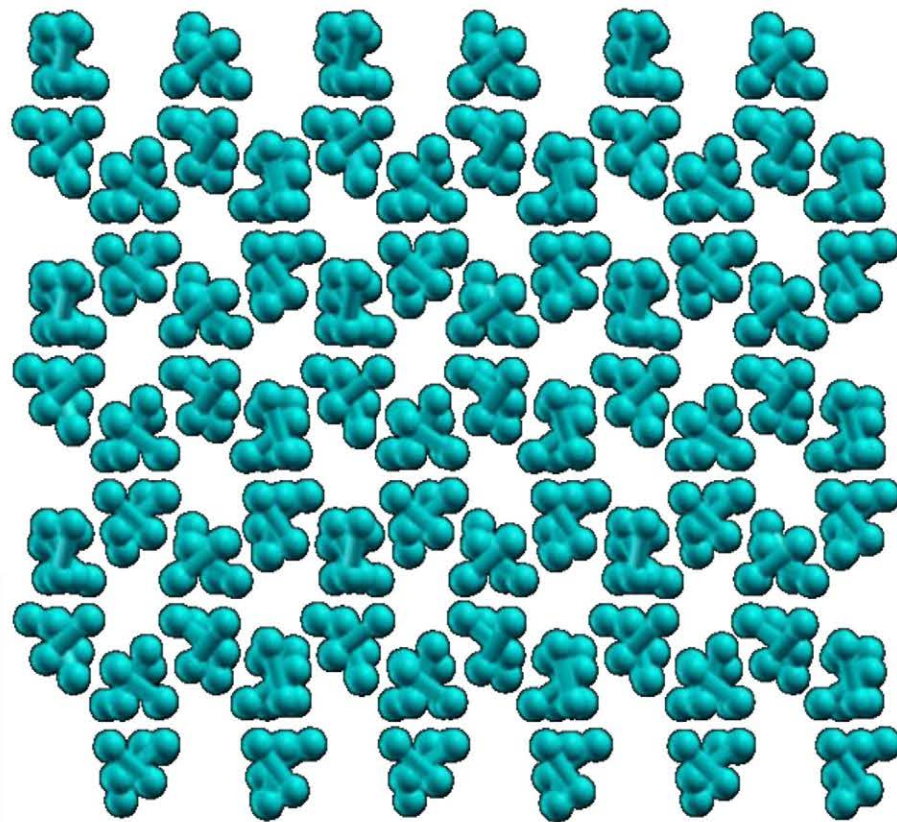
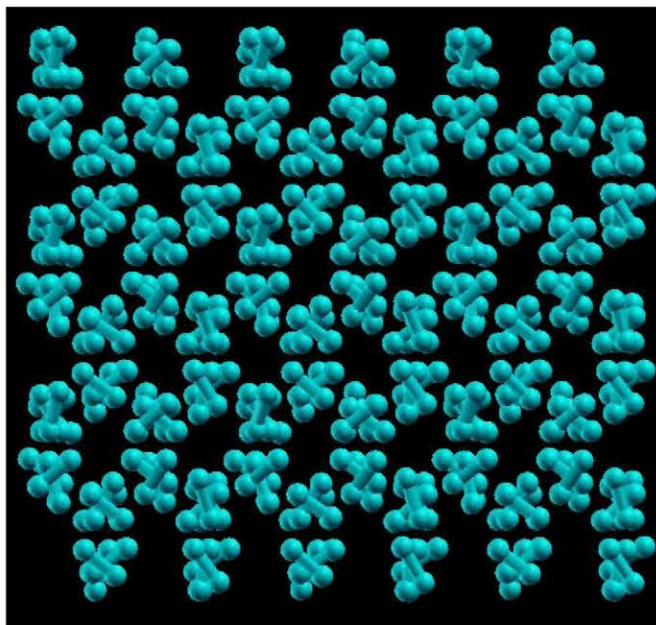


Guerrero et al, Proceeding IFSA 2012





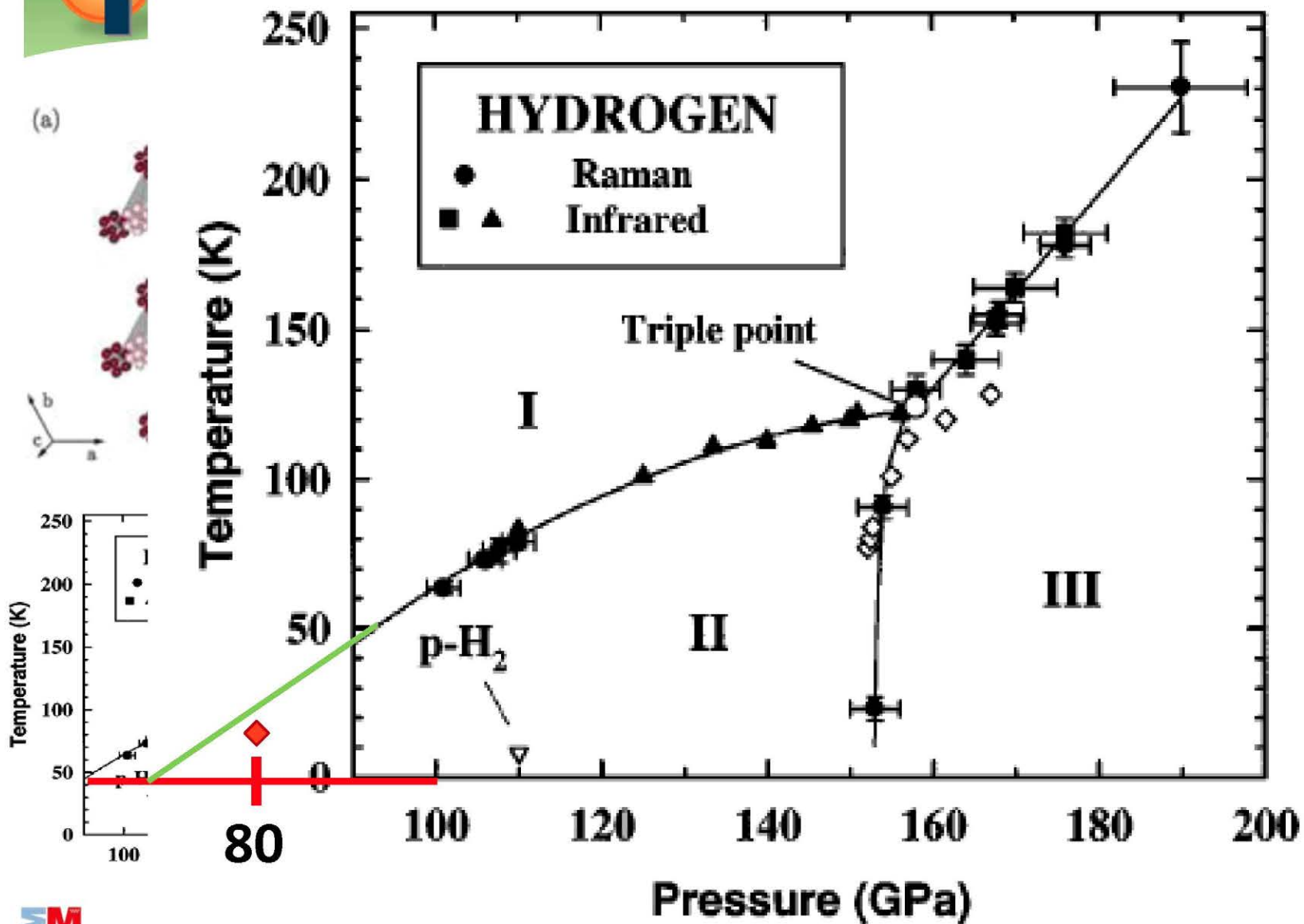
Hidrógeno 15K 80 GPa 1 ps



Guerrero et al, Proceeding IFSA 2012



Transición de Fase



9



ribed
solid
I
ve it
is



Estrategía de Simulación

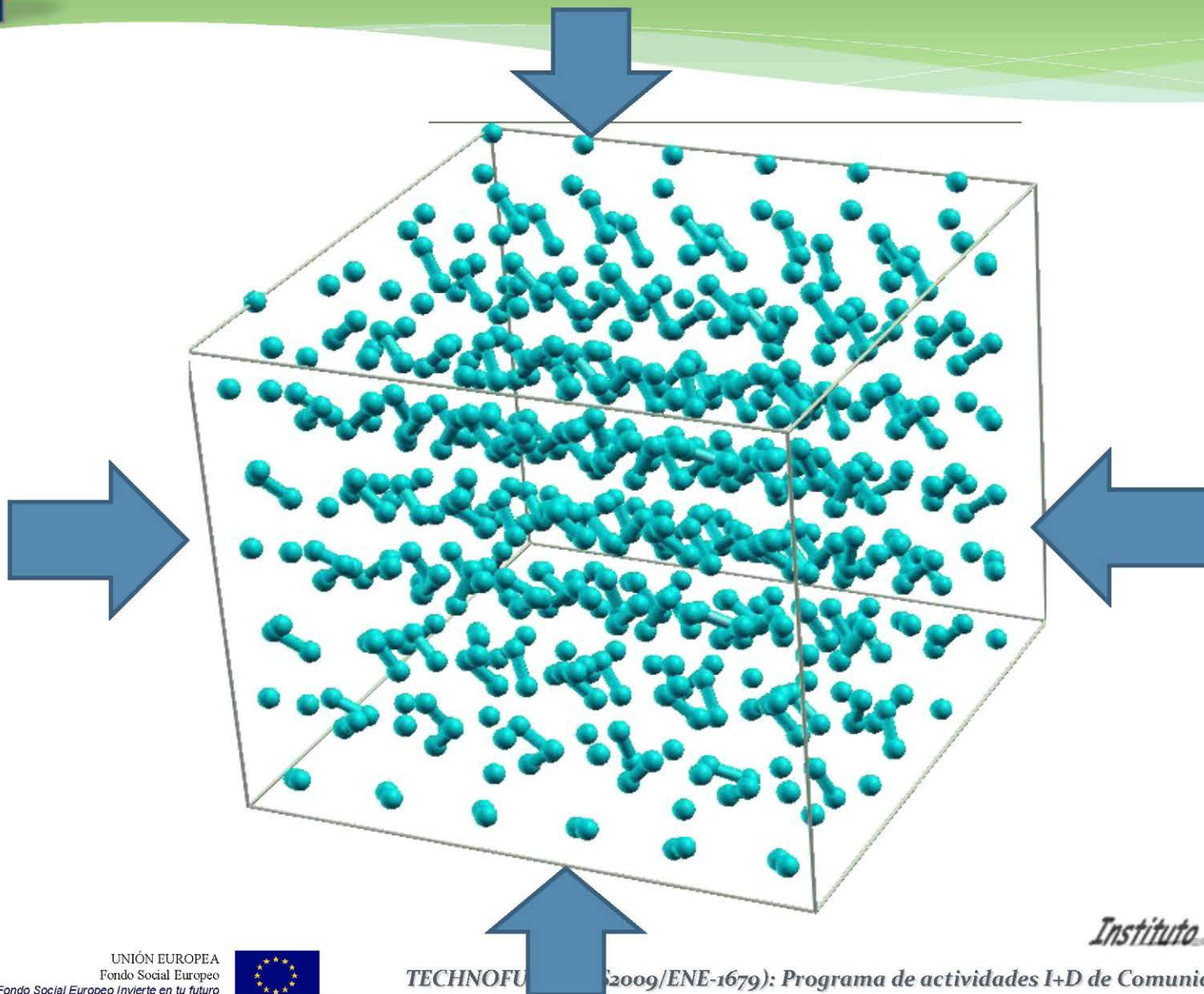
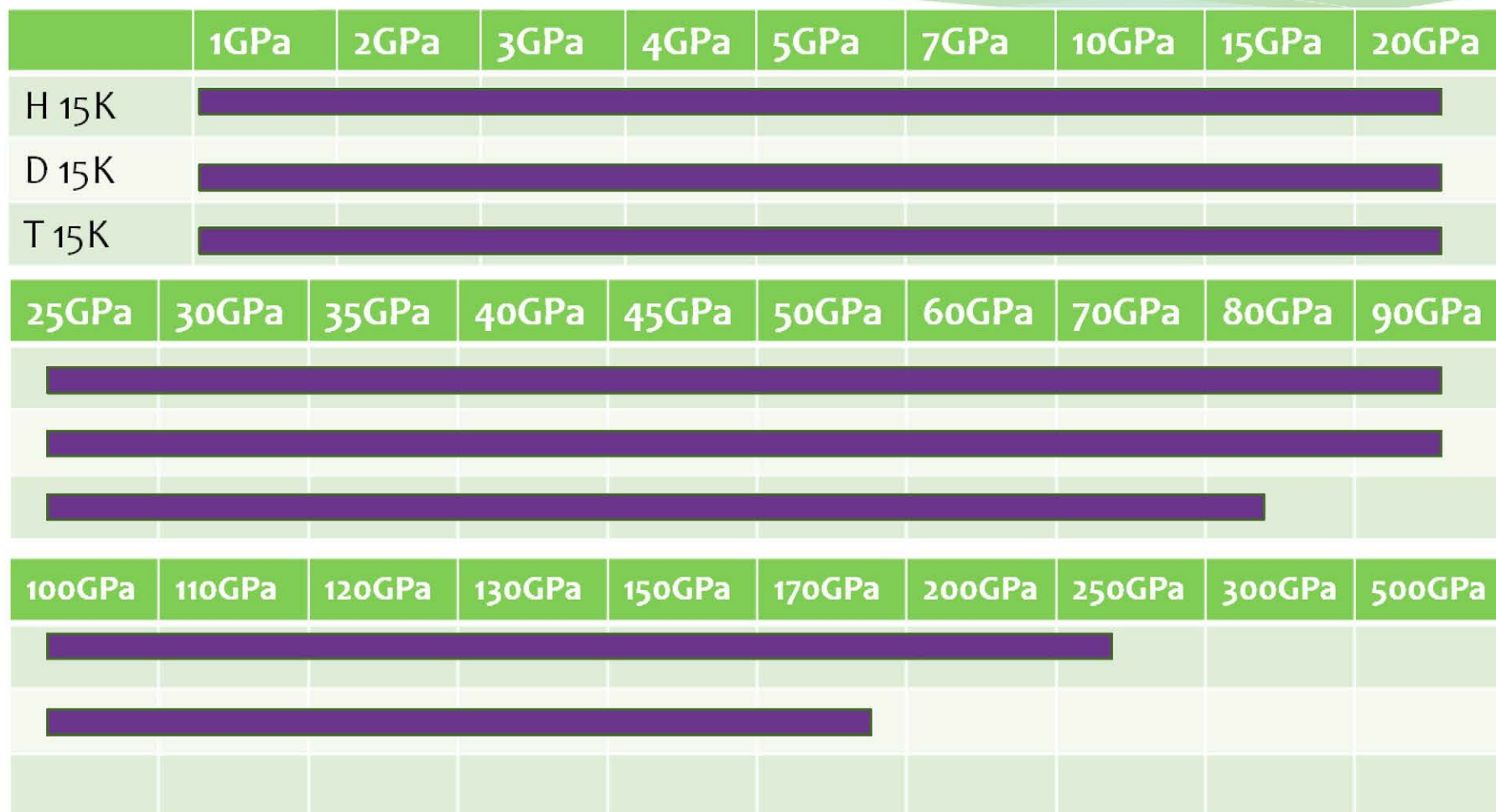


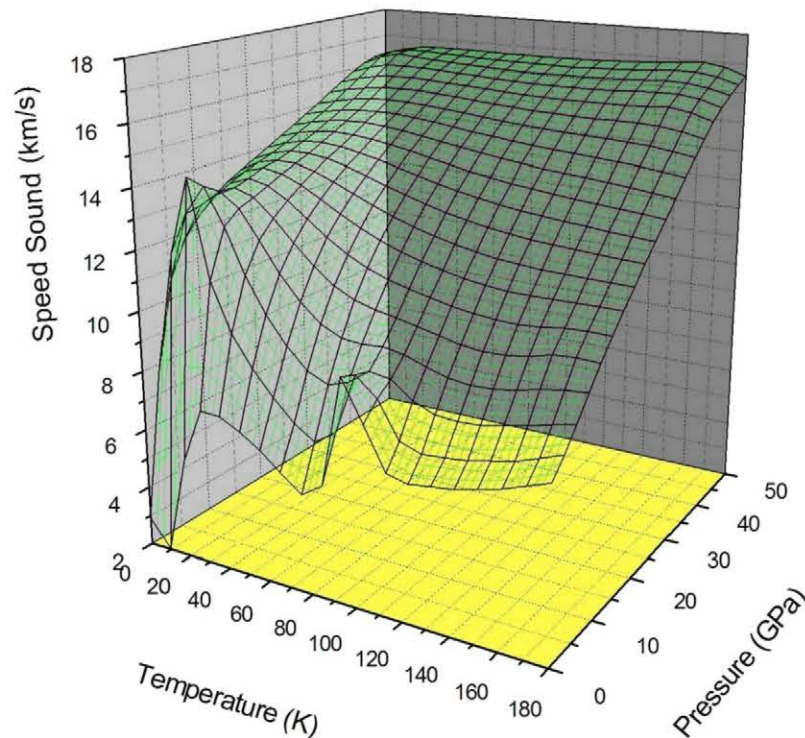
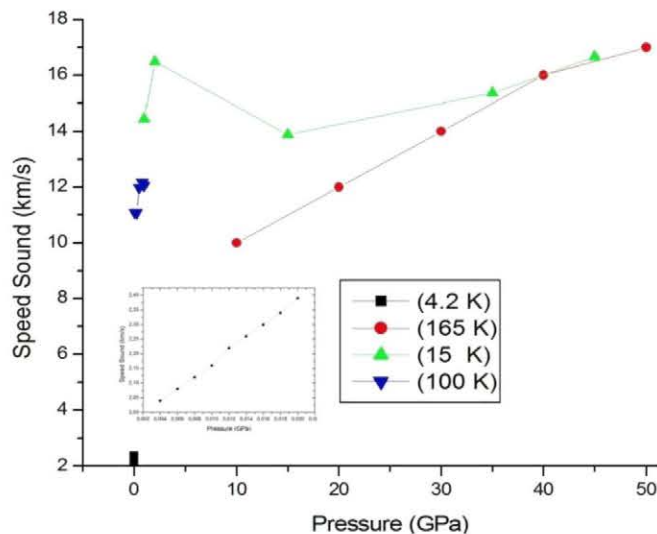


Tabla de cosas hechas: Costes Computacionales





Velocidad del Sonido



$$\begin{pmatrix} \epsilon_{xx} \\ \epsilon_{yy} \\ \epsilon_{zz} \\ \epsilon_{xy} \\ \epsilon_{xz} \\ \epsilon_{yz} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{E_x} & -\frac{\nu_{yx}}{E_y} & -\frac{\nu_{zx}}{E_z} \\ -\frac{\nu_{xy}}{E_x} & \frac{1}{E_y} & -\frac{\nu_{zy}}{E_z} \\ -\frac{\nu_{xz}}{E_x} & -\frac{\nu_{yz}}{E_y} & \frac{1}{E_z} \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{zz} \\ \sigma_{xy} \\ \sigma_{xz} \\ \sigma_{yz} \end{pmatrix}$$





Recientes Debates 2011-2012

PRL **108**, 125501 (2012)

PHYSICAL REVIEW LETTERS

week ending
23 MARCH 2012

Mixed Molecular and Atomic Phase of Dense Hydrogen

Ross T. Howie,¹ Christophe L. Guillaume,¹ Thomas Scheler,¹ Alexander F. Goncharov,² and Eugene Gregoryanz^{1,*}¹*Centre for Science at Extreme Conditions and School of Physics and Astronomy, University of Edinburgh, Edinburgh, EH9 3JZ, United Kingdom*²*Geophysical Laboratory, CIW, 5251 Broad Branch Road, Washington, D.C. 20015, USA*

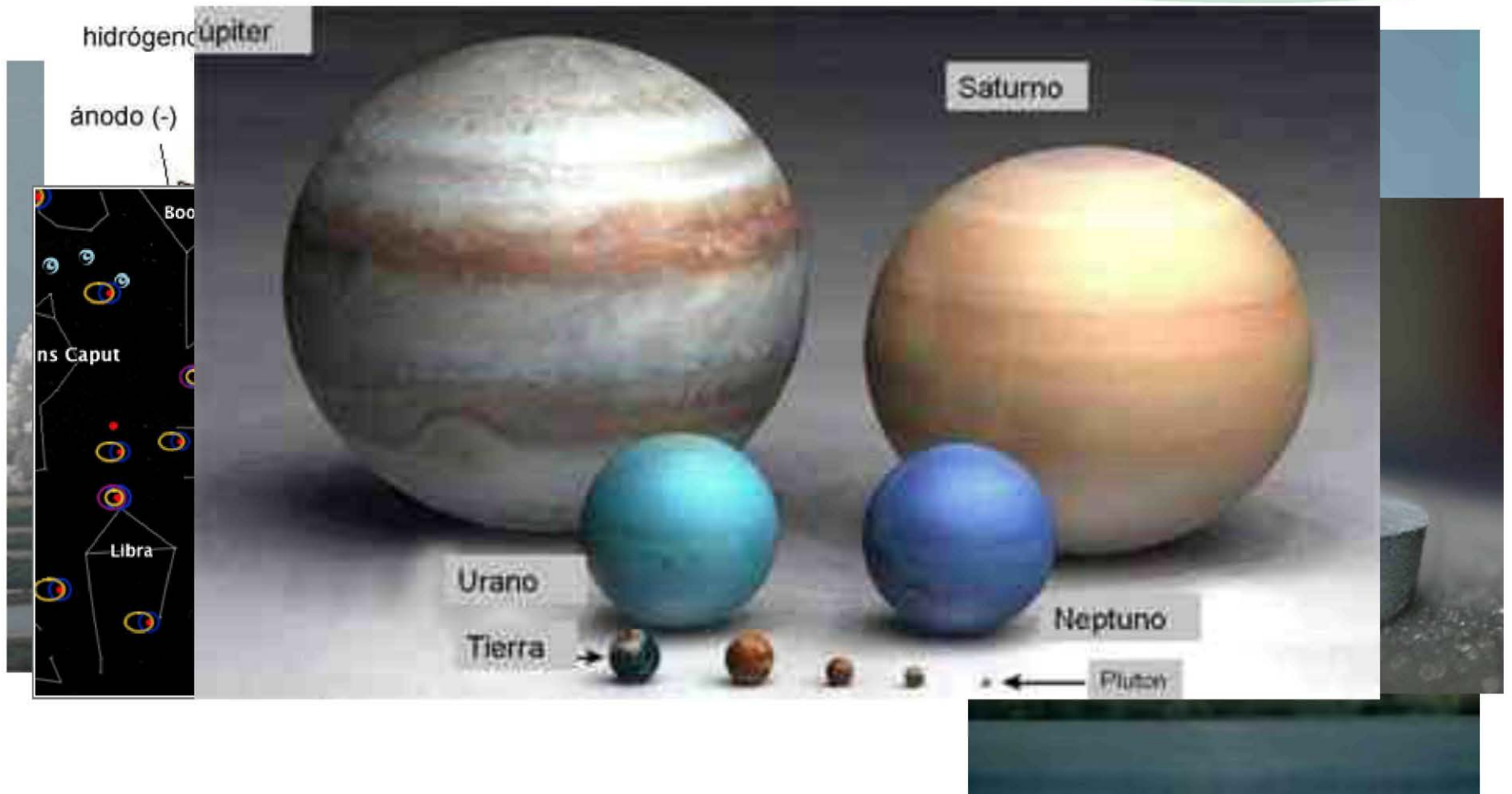
(Received 1 November 2011; published 19 March 2012)

We used Raman and visible transmission spectroscopy to investigate dense hydrogen (deuterium) up to 315 (275) GPa at 300 K. At around 200 GPa, we observe the phase transformation, which we attribute to phase III, previously observed only at low temperatures. This is succeeded at 220 GPa by a reversible transformation to a new phase, IV, characterized by the simultaneous appearance of the second vibrational fundamental and new low-frequency phonon excitations and a dramatic softening and broadening of the first vibrational fundamental mode. The optical transmission spectra of phase IV show an overall increase of absorption and a closing band gap which reaches 1.8 eV at 315 GPa. Analysis of the Raman spectra suggests that phase IV is a mixture of graphenelike layers, consisting of elongated H₂ dimers experiencing large pairing fluctuations, and unbound H₂ molecules.





Otras Aplicaciones:



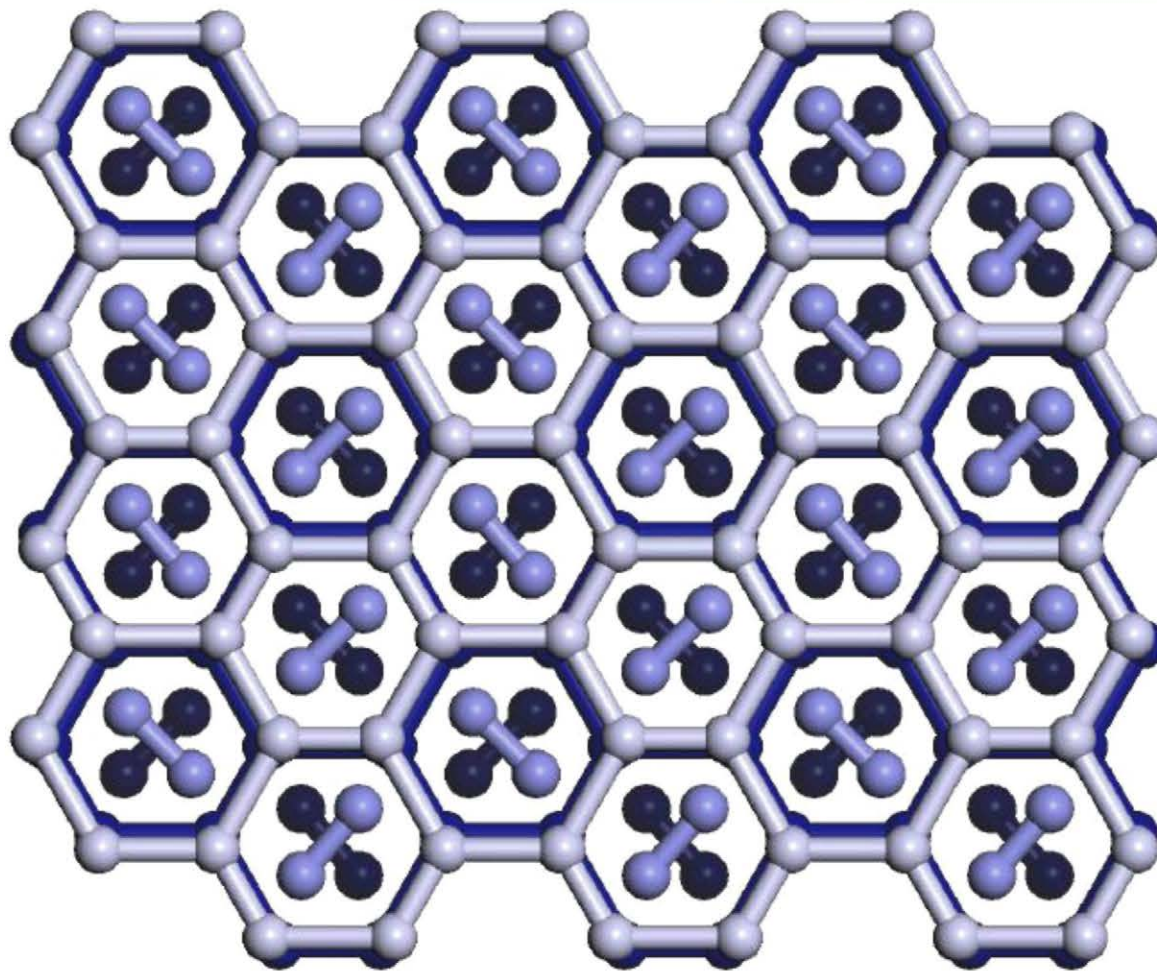
Instituto de Fusión Nuclear





Actuales Resultados

$P > 200 \text{ GPa}$



Pickard et al, Hidrógeno punto cero, Mayo 2012





Conclusiones



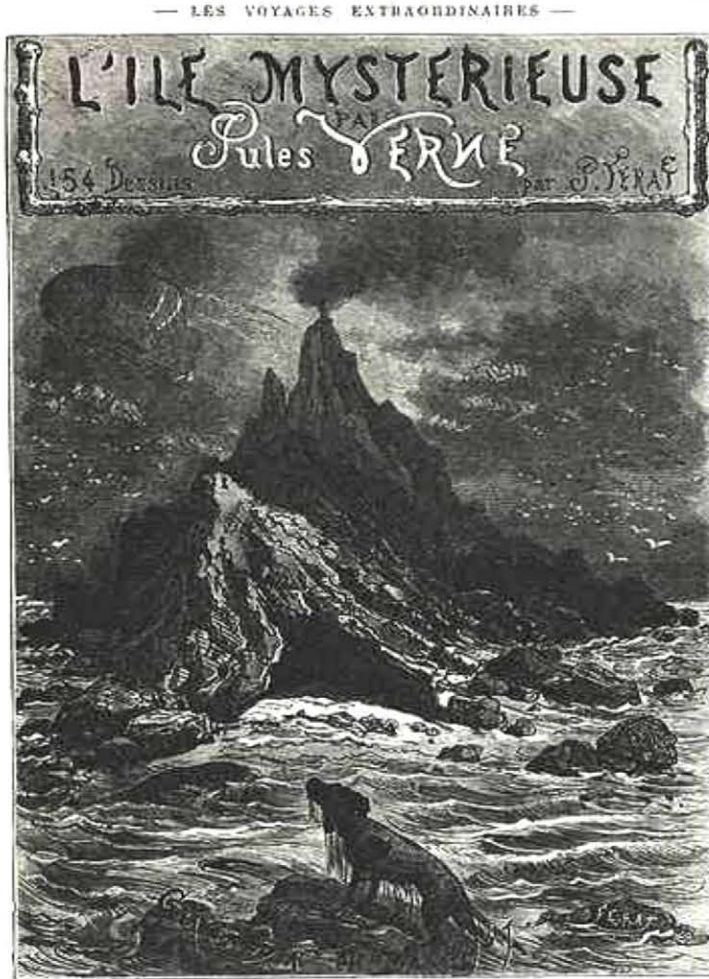
POLITÉCNICA

- * Tenemos una Metodología Multiescala por medio de la cual es posible estudiar las propiedades mecánicas de los isótopos de Hidrógeno.
- * Observamos transiciones de Fase acorde con las reportadas por estudios experimentales
- * Existen discontinuidades en la variación de la velocidad del sonido que deben ser mejor estudiadas.
- * Proponemos nuevas estructuras cristalinas para el Hidrógeno en Altas Presiones $P > 200$ Gpa.
- * **Propuestas a Futuro:**
- * CSIC-UPM: estudio por espectroscopia Raman de las Transiciones de Fase en el Hidrógeno y Deuterio cercanas al punto triple, fabricación.
- * Estudiar otros materiales en condiciones de Alta Presión (Be, C, Al, etc)
- * Estudiar los efectos de la interfase Be-HDT, C-HDT, etc.
- * Se proponen experimentos con LASER (propuesta del grupo IFN) para generar altas presiones y estudiar materiales al alta presión.





Hace más de 100 años...



COLLECTION HETZEL

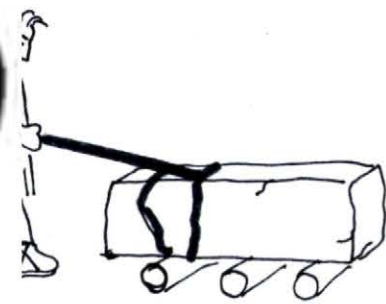
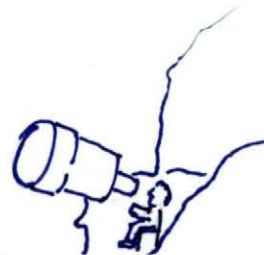
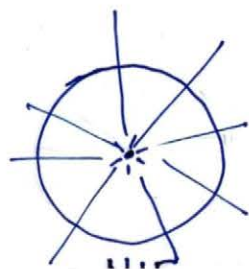
«Sí, amigos míos, creo que el agua será algún día utilizada como combustible, que el **hidrógeno** y el oxígeno que la constituyen -utilizándolos juntos o por separado- proporcionarán una fuente inagotable de calor y luz de una intensidad que no tiene el carbón»

La Isla Misteriosa (1874) Julio Verne





... son necesarias
muchas manos para
llevar a cabo grandes
obras artísticas y
científicas ...



Muchas Gracias